Case study

理論化学からレアメタルの魅力的な特性の解明に挑む

ディラック方程式に基づく相対論的な量子化学計算を実現するため 最大4TBの潤沢なメモリーを搭載できるHP ProLiant DL980 G7を活用

業界
官公庁・研究機関

目的
相対論的量子化学計算を現実的な時間で実行する効率的な独自プログラムの開発

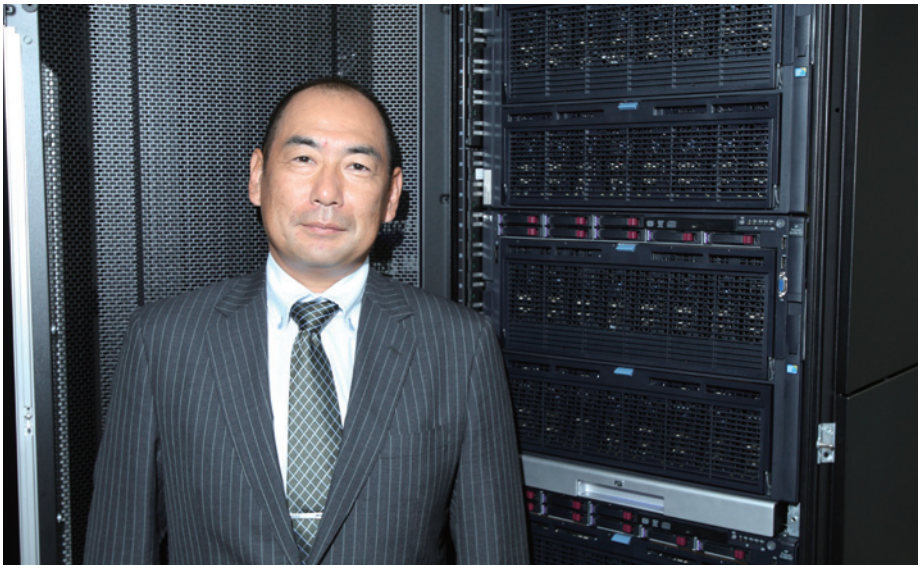
アプローチ
- 膨大で複雑な処理を行う量子化学計算用プログラムの開発に不可欠な潤沢なメモリーの搭載
- 将来的な超並列処理を見据え、500コア程度の並列度を実現したコンピューターの導入
- 高性能なインテル® Xeon® プロセッサー E7ファミリーを搭載するHP ProLiant DL980 G7の7ノード構成で、528コアのハードウェア環境を構築

ITの効果
- 複雑な量子化学計算を現実的な時間で実行可能なハードウェア環境を構築
- 使用するメモリー量を意識することなく、独自の大規模並列プログラムの開発が可能に

ビジネスの効果
- 量子化学計算に相対論的な効果を本格的に取り込むという革新的試みに挑む
- 従来の量子化学計算では取り扱えなかったレアメタルなどの重い元素の特性に対する高精度計算が可能に

THEORY FOR ELEMENT STRATEGY

HPC



量子化学計算では扱う変数が非常に多く、潤沢にメモリーを利用できない場合には、プログラミングの際に様々な工夫が必要です。こうした余計なことで悩むより、本来の意味でのプログラム開発に集中したい。利用できるメモリーが大きければ大きいほど、開発のストレスも緩和でき、計算時間も短縮されます。

中井浩巳氏　早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 教授

試験管やフラスコなどの器具を使って実験を行うイメージの強い化学の研究室の中で、コンピューターに向かって研究に取り組む少し変わった研究室がある。早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科の中井浩巳教授が率いる理論化学の研究室である。中井研究室では、レアメタルなどの重い元素の特性を理論化学のアプローチで解明するためのプロジェクトが動き出している。鍵となるのは、従来の量子化学計算で基礎としてきたシュレディンガー方程式に代えて、相対論的な基礎方程式であるディラック方程式を直接解くということ。世界的にも極めて革新的なこの挑戦がHP ProLiant DL980 G7上で進められることになった。

早稲田大学 理工学術院
先進理工学部 化学・生命化学科 教授
中井 浩巳 氏

理論化学の最先端を走る野心的な研究

世界は多様な物質で満ちている。基になる元素は同じでも、その組み合わせによってまったく性質の異なる物質となるからである。こうした多様性の秘密に迫る学問ともいえる化学では、試験管やフラスコを使って実験を繰り返すイメージが強い。新しい化合物を創り出し、その性質を確かめる実験によって、多くの化学的発見がなされてきた。

これに対し、基本となる数式や理論モデルなどを基に、演繹的に多様性の秘密に迫ろうとするのが理論化学だ。物質の性質や化学反応では、電子が重要な役割を担っている。電子の状態や振る舞いを記述する基礎方程式である「シュレディンガー方程式」が1926年に発表された。これを契機に理論化学という新たな研究領域が勃興。そして、複雑なシュレディンガー方程式を解くためにコンピューターとその上で動くプログラムが使われるようになったことで、1960年代以降、理論化学は飛躍的に発展する。

理論化学の大きな目的の一つとして、多様な化学現象に潜む普遍的な原理の理解・解明が挙げられる。加えて、応用の側面からは、原子・分子の微視的な振舞いを直接シミュレーションすることで現象を再現・解釈・予測することももう一つの目的といえる。理論化学の重要性に対する認識は近年ますます高まっており、2013年のノーベル化学賞が理論化学の研究者に贈られたことはその証左ともいえるだろう。

中井研究室も、理論化学、特に電子状態理論の分野で先進的な研究に取り組んできた。そして2012年10月、レアメタルの特性の解明に理論化学からアプローチする野心的な研究で、国が推進する「戦略的創造研究推進事業」の1つである「CREST（Core Research for Evolutional Science and Technology）」に採択された。この研究で鍵を握るのはコンピューターを駆使した量子化学計算である。そのために、高性能なインテル® Xeon® プロセッサー E7ファミリーを搭載するHP ProLiant DL980 G7が採用された。

中井研究室のメンバーが勢ぞろい

レアメタルの特性の発現メカニズムに理論化学で迫る

「CREST」は、日本が直面する戦略的な課題に資する革新的な科学技術シーズを創出するための基礎研究を推進する国家プロジェクトである。CRESTプロジェクトをとりまとめている科学技術振興機構(JST)では、広汎な研究領域を設定し、研究の提案を募っている。その中の一つである、「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」で、中井教授を中心に大学や研究機関の枠を超えて結集した理論化学研究者チームの提案が採択された。掲げた研究課題は「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」である。

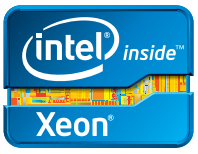
研究の狙いを、中井教授は次のように解説する。「『元素戦略』とは、物質の特性や機能を決定している特定の元素が果たす役割を理解し、有効活用していこうというものです。具体的なターゲットとしているのは、レアメタル・レアアースといった元素です。これらは、特性向上のため鉄や銅などのベースメタルに添加されたり、電子材料や磁性材料などの機能性材料に利用されたりします。これらの元素そのものの特性を理論化学的に理解し、どのようなメカニズムで特性の向上や材料の機能性の発現を果たしているかを解明します。長期的には、レアメタルの使用量を減らす、代替となる物質を探索し、さらには設計する、といった取り組みにつなげたいと考えています。」

相対論的なディラック方程式で量子化学計算の限界を打ち破る

研究を進めるにあたっては、手法としてコンピューターを使った量子化学計算を用いる。しかし、実はここに極めて重大な課題が潜んでいる。従来の量子化学計算では、基礎方程式としてシュレディンガー方程式が用いられてきた。ところが、この方程式には限界があるというのだ。

「周期表の上の方にある軽い元素については、シュレディンガー方程式で精度よく電子状態を記述できます。しかし、レアメタルなどの金属は周期表の下の方に位置する核電荷の大きい元素であり、こうした元素では電子が原子核の周囲を光速に近いスピードで運動しています。このような電子状態を正確に記述するためには、量子力学的効果だけでなく、相対論的効果を考慮する必要があります。量子力学だけに基づいたシュレディンガー方程式の限界はここにあるのです」と、中井教授は指摘する。

そこで、相対論的効果を考慮したディラック方程式を量子化学計算の基本方程式に据えるという、革新的な取り組みに挑むことになる。「ディラック方程式を用いた量子化学計算は極めて複雑であり、非常に重い演算処理といえます。現実的な時間内に計算結果を得られるよう世界中の研究者が長年取り組んでいるので



インテル® Xeon® プロセッサー
E7ファミリー

■各拠点よりHP ProLiant DL980をリモートで活用

RAQET
RELATIVISTIC AND QUANTUM ELECTRONIC THEORY

ハードウェア: HP ProLiant DL980 G7×7台
搭載プロセッサー: インテル® Xeon® プロセッサー E7-4870 2.4GHz 8基／80コア×5台
インテル® Xeon® プロセッサー E7-2830 2.13GHz 2基／64コア×2台
合計528コア
搭載メモリー: 512GB(1ノードあたり)
搭載記憶領域: 900GB×8台(1ノードあたり)
OS: Cent OS

すが、これが一筋縄ではいかない。数個の原子を含む系しか計算を行えないのが現状です。このため、シュレディンガー方程式を用いた非相対論的な量子化学計算の一部に相対論的な効果を便宜的に取り込む取り扱いがなされてきました。しかし中井研究室では、これまで積み重ねてきた研究をベースに、新しい理論に基づく計算手法を数年前に開発しました。これをディラック方程式の計算にも拡張することで、数万原子規模に適用できる可能性があります」(中井教授)。

潤沢なメモリーを駆使できることがHP ProLiant DL980最大の魅力

採択されたプロジェクトのコアとなるのは、ディラック方程式を用いた量子化学計算を大規模系に対しても効率的に実行できるプログラムを独自に、しかもまったく一から開発することである。そのためには、量子化学計算では導入が難しい並列処理を駆使しなければならない。アルゴリズムやプログラムの全面的な改良・見直しの必要がある。

「最終的には、神戸の理化学研究所計算科学研究機構にある『京』のような超並列コンピューターを使って計算を行うことも想定しています。ただ、プログラム開発の初期段階から、約70万コアもの巨大な並列環境を使っても意味がありません。そこで、本プロジェクトでは、並列化の効果を確認しやすい500コア程度のコンピューター環境をいつでも使えるようにしたいと考えていました」と中井教授は振り返る。

2013年5月、こうした要望を複数のサーバーベンダーに説明。提案を受け取った中で、機能面、コストパフォーマンスの高さから中井教授の目に留まったのがHP ProLiant DL980 G7だった。

「HP ProLiant DL980 G7で最も魅力的だった点は、1ノード当たり最大で4TBの巨大なメモリーを利用できることでした。実際に採用したのは512GBでしたが、これでも一般的なエントリーサーバーの4〜5倍です。量子化学計算では扱う変数が非常に多く、潤沢にメモリーを利用できない場合には、プログラミングの際に様々な工夫が必要です。こうした余計なことで悩むより、本来の意味でのプログラム開発に集中したい。利用できるメモリーが大きければ大きいほど、開発のストレスも緩和でき、計算時間も短縮されます」(中井教授)。

「相対論的電子論」が切り拓く化学のイノベーション

2013年8月の夏休みも終わるころ、7ノードのHP ProLiant DL980 G7で構成された、合計528コアのハードウェア環境が稼働を開始した。

「ノード間はInfiniBandで接続しているのですが、その通信がボトルネックになることもなく、HP ProLiant DL980 G7には非常に満足しています。500コアの並列度も、将来的な京などの超並列計算への橋渡しとして、ちょうど良かったと思います」と中井教授は笑顔を見せる。

HP ProLiant DL980 G7上で開発を進めるディラック方程式をベースにした相対論的な量子化学計算プログラムは、すでに「RAQET(Relativistic And Quantum Electronic Theory)」と名付けられている。プロトタイプの開発に目処がたった段階で、日本全国、さらには米国にも広がるプロジェクトメンバーに、HP ProLiant DL980 G7で構成したハードウェア環境をリモート接続で公開する予定だ。共同利用を通じて、「RAQET」の実用化に向けたブラッシュアップや、実際にプログラムを活用して現実の問題に応用する最先端の研究が展開される。

しかし、中井教授はさらにその先を見据えてい

る。今後5年間に及ぶこのプロジェクトを通じた相対論と量子化学との融合により、中井教授が提唱する「相対論的電子論」を実現することで、全く新しい理論化学の領域を切り拓こうというのだ。

「量子化学が誕生した直後の1930年代には、共鳴、混成、電気陰性度といった多くの化学原理が発見されました。『相対論的電子論』は、新しい時代の化学原理を導くと確信しています」と中井教授は自信を見せる。

理論化学は、物質の特性やその発現メカニズムの根底にある原子・分子、さらには電子レベルでの微視的な現象を取り扱う、極めて基礎的かつ汎用的な研究領域である。今やその対象は、化学のみならず材料科学や生命科学などにまで広がっている。

「量子化学計算に相対論を本質的に導入することは、研究者の思考にも大きな転換を迫るはずです。まったく新しい、これまでとは次元の異なるアイディアが産まれる。いわばパラダイムシフトともいえる状況へのきっかけづくりを、HP ProLiant DL980 G7上で進めていきたいですね」と、中井教授は締めくくった。

ソリューション概略

導入ハードウェア
HP ProLiant DL980 G7

導入ソフトウエア
Open Grid Scheduler GE2011.11p1
Intel Composer XE 2013
Intel MPI Library

安全に関するご注意　ご使用の際は、商品に添付の取扱説明書をよくお読みの上、正しくお使いください。水、湿気、油煙等の多い場所に設置しないでください。火災、故障、感電などの原因となることがあります。

お問い合わせはカスタマー・インフォメーションセンターへ
03-5749-8328 月～金 9:00～19:00　土 10:00～17:00（日、祝祭日、年末年始および5/1を除く）
機器のお見積もりについては、代理店、または弊社営業にご相談ください。
HP ProLiantに関する情報は http://www.hp.com/jp/proliant

Intel、インテル、Intel ロゴ、Intel Inside、Intel Inside ロゴ、Xeon、Xeon Insideは、アメリカ合衆国および / またはその他の国におけるIntel Corporationの商標です。
記載されている会社名および商品名は、各社の商標または登録商標です。
記載事項は2013年10月現在のものです。
本カタログに記載されている情報は取材時におけるものであり、閲覧される時点で変更されている可能性があります。あらかじめご了承ください。
© Copyright 2013 Hewlett-Packard Development Company,L.P.

本カタログは、環境に配慮した用紙と植物性大豆油インキを使用しています。 PRINTED WITH SOY INK

日本ヒューレット・パッカード株式会社
〒136-8711 東京都江東区大島2-2-1